

Képle megközelítés

1) Molekuláris biofizika

A biológiai anyag szerkezeti vonatkozásait hogyan lehet fizikai módszerekkel közelíteni.

– molekuláris szerkezet és fizikai megközelítéssel

2) Biológiai anyagok

Az anyagot hogyan lehet fizikai módszerekkel leírni

fizikai módszerek és paraméterek a speciális biológiai

rendszerek leírására és jellemzésére

A molekuláris szerkezetek alakító kölcsönhatások és funkcionális jelentőségük

A szerkezeti rend kialakulásának szempontjai

molekulák / macromolekulák / komplexek

szigorú, de nem statikus rendszer

Order molekulák és macromolekulák között

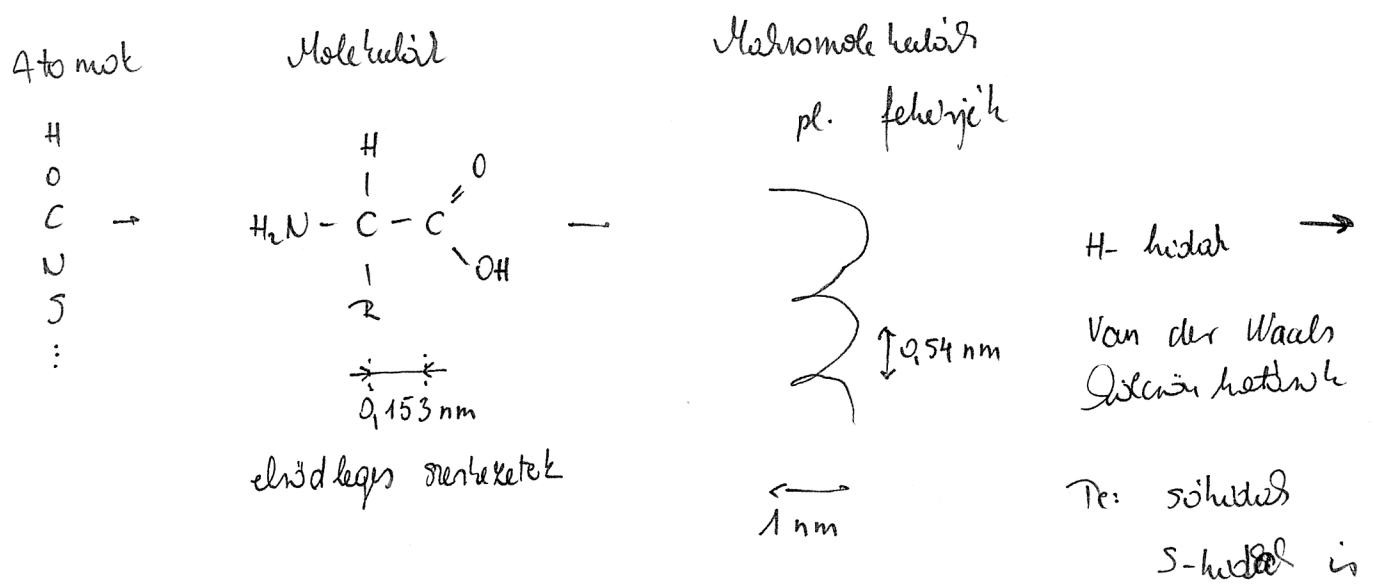
– meghatározott szerkezeti elemek, amelyek nem lehetnek abszolút a szét választottak

– a rend szigorú, de nem statikus

– folyamatos változás, amiben a szerkezeti elemek is részt vesznek

– az elemek rendelkeznek a kellő energiával a kinyúlással, hogy nem időben állandó a szerkezetük

Biológiai rendszert szerkezet a Jónak leírására jellemző ②



R- reziduum → itt aminosav

Az atomok → alkotó elemek - elődleges Jónak: aminosavak
 a közbülső a rendet határozza meg

- Az alapanyag szét meghatározó Jónak feltt →
- többlet rendszerek
 - ezek gyengebb Jónak : H- hidat, Van der Waals Jónak.
 - de vannak kovalens kapcsolatok, sóhidat u. elektrostatikus ionos Jónak

+ ezek meg több rendszer megoszott formában

Kb. 20% köztük a térszerkezet felépítése

Térszerkezet → egy egység, a szét szintén nyilvánul meg

Macromolekula lehet:

Fehérje - második szerkezeti elemek :
 alfa helix, beta lemez

DNS fehérje helix szerkezetek
 → onként is közbülső → a szerkezet kialakulása függ a
 Jónak kölcsönhatásból
 szimmetria + második szerkezet

Kettős lipid réteg - biológiai membránok

lipid membránok komplexei felépítik a membránba építve - ábrázoló képe

Az ábrán számítógépes simuláció eredménye látható
→ egy pillanatfelvétel

Molekulák közötti kölcsönhatások biológiai sz. -ekben

Molekulák összehasonlítása Joulens listéi → Jémité :

→ nem ennyire homogén az anyag

Kezesebb rendű kölcsönhatások:

Elektrosztatikus kölcsönhatások

1) Coulomb kölcsönhatás

q_1 és q_2 ponttöltés r távolságban

A potenciális energia

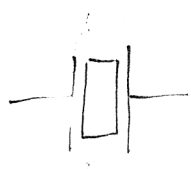
$$E_{cb} = \frac{q_1 \cdot q_2}{\epsilon \cdot r}$$

ϵ - (relatív) dielektrikus állandó

A relatív dielektrikus állandó $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$

"dielektrikum": elektromos tér által az anyagban - Faraday

Definíció: kondenzátor kapacitása alapján



kondenzátor kapacitása $C = \frac{q}{u} = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r A}{d}$

(A: kondenzátor lemezeinek felülete m^2)

(d: lemezek távolsága m)

ϵ_0 : a vákuum dielektrikus állandója $8,854 \cdot 10^{-12} \frac{As}{Vm}$

ϵ_r : a feltételezett töltött anyag relatív dielektrikus állandója (mértékegység nélküli)

→ megmutatja, hogy az adott dielektrikummal a kondenzátor kapacitása hányszorosa a vákuumban mért kapacitásnak ($\epsilon_r > 1$)

A dielektrikum részecskéi polarizálódnak elektromos térben.
a fagyaszorított töltés értéke nő

Két fontos tény: $\epsilon_r = 80$ → kölcsönhatási energia jelentősen leszorítja a vízben oldódást
apólinos hidrogénbont: $\epsilon_r \approx 2$ (felhívja feltehetően)
→ jelentősen módosítja az elektrosztatikus kölcsönhatásokat

A Coulomb-potenciál termodinamikai értelmezés során oldatként

E_{cb} az elektrosztatikus tér munkáját adja meg oldatban hőmérsékleten és nyomáson miközben a töltés töltéssűrűsége végtelenül "r"-re változik

E_{cb} - a Gibbs-potenciál változásának felel meg
 $E_G = \Delta G = \Delta H - T \Delta S$ (Gibbs-féle szabad energia)
S - entropia H - Gőzellentartási energia (entalpia)

miért lehet a E_G potenciálnak entropikus jellege?

$H = U - pV$ U: belső energia

$\Delta S = - \frac{\partial \Delta G}{\partial T} = - \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{q_1 q_2}{\epsilon r} \right) = \frac{q_1 q_2}{\epsilon^2 r} \frac{\partial \epsilon}{\partial T} = \Delta G \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial T}$

T = 300K érték: $T \Delta S = -1,38 \Delta G$

u. $\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial T} = -0,0046 \frac{1}{K}$

A E_G -potenciál ellen hat
A E_G -potenciál nemcsak a kölcsönhatási energiát fedezi (ΔH), hanem az ionokhoz a vízmolekulákhoz kötődő

Metéret is (5 csőben)!

A dipólusok miatt → orientációs effektek → rendeződés
→ emiatt a rez. rendszerre nem alkalmazható

A Gibbs-potenciál változást ritkán fel termodinamikai potenciálból
jel. - Lellephet egy entropia változás is

$$\Delta S = \Delta G \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon}{\partial T} \quad (\Delta G - \text{eredeti munkavégzés})$$

Ha minden hőmérséklet független a dielektrikus állandótól,
akkor nem kell számolni az entropia változásával

→ DE a víz nem ilyen

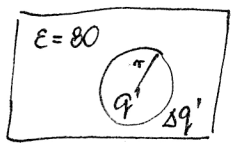
$$300K\text{-nél} \quad T\Delta S = -1,38 \Delta G$$

Nemcsak a kötés kialakulásához kell energia, hanem a
rendszerhez fenntartásához is.

- Rendeződési effektus - mindig meg kell nézni, hogy
mi történik az entropia vonatkozásában...

A Coulomb-potenciált számított hidratációs energia
→ Born-energia

A hidratációhoz is lehet ~~energia~~ energia igényt rendelni



ϵ dielektrikus állandójú közegbe kerülve
töltést (q' töltéshez adunk dq' -t)
Coulomb-felé húzóerőt indukálunk ki

$$\delta G = \frac{q' \delta q'}{\epsilon \cdot r} \rightarrow \Delta G = \frac{1}{\epsilon r} \int_0^q q' dq' = \frac{q^2}{2\epsilon r}$$

A vezetett munka (ΔG), ha egy ϵ dielektrikus állandójú
közegbe egy r sugarú üregbe q töltést viszünk ki
pl. hidratációs energia

Mellette a vezetett munka, ha egy iont (pl. Na^+) vízbe

egy makromolekula v. lipid membrán feléjebe áramlik ahonni?

$$\Delta G_{\text{total}} = \Delta G \Big|_{\epsilon_r=80} - \Delta G \Big|_{\epsilon_r=2} = -355 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \rightarrow \text{NAGY ÉRTEK}$$

Nagyon: $\epsilon_r = 80$ vízben
 $\epsilon_r \approx 2$ apoláros szénhidrogénben

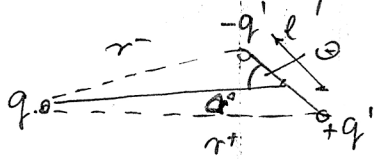
Ez azt jelenti egyrészt, hogy vízben jóval nagyobb része fordódik az anyagcsereket rendezésére, mint apoláros szénhidrogénben, ahonnan az a következtetés, hogy nagy energiára van szükség ionok átvitelére vízben apoláros szénhidrogénben...

2. Dipól-kölcsönhatások

ponttöltés - dipól / dipól - dipól / statikus dipól / forgó dipól / indukált dipól

Egy nagy makromolekulában bőségesen van dipól

Egy egy sorú ~~szomszédos~~ pólus - ponttöltés kölcsönhatás egy állandó dipóllal



Közelítő mérés: $l \ll r$

Ké jellemző energiát szeretnénk tudni

$$E_{\text{d. stat.}} = -\frac{q' \cdot q}{\epsilon \cdot r} + \frac{q' \cdot q}{\epsilon \cdot r} \approx -\frac{q \cdot m \cos \theta}{\epsilon \cdot r^2}$$

ahonnan $\cos \theta$ kiírás
 \rightarrow az érték mindig lesz

ahol \uparrow az abszolút érték + elnevezés után
 $\underline{m} = q' \cdot \underline{l}$ dipólus momentum vektor

~~ahonnan~~ $m \cdot \cos \theta$ \rightarrow \underline{m} vektor α irányába eső vetülete...

$E_{\text{d. stat.}}$ arányos $\frac{1}{r^2}$ -tel \rightarrow erősen csökken a távolsággal, mint a Coulomb kölcsönhatás...

Trend: mivel komplexabb kötésel rendelkező ~~szerves~~ hatóanyagok (7)

Jólcső, annál erősebben csökken az energia a távolsággal
- annál magasabb fokú viszonyban van az $\frac{1}{r^6}$

Pl. Jét dipólusok + orientációs mozgás

$$E_{\text{mórgó Dipol-Dipol}} = - \frac{m_1^2 m_2^2}{3 \epsilon^2 (\pi^6) \cdot kT}$$

a szabad orientációt csökkenti a jólcsővel való érintkezéssel és növeli a hatótávolságot

Egy jólcső legs dipol jólcsővel:

Dipol-dipol jólcsővel - Van der Waals jólcsővel
(London-féle erő)

Alapjelenség: a töltéssel rendelkező molekulákon belül az atomok hőmozgása miatt fluktuál \rightarrow tranzienstöltésmomentumok

egymás jólcsővel lévő molekulák tranzienstöltésmomentumok jólcsővel \rightarrow indukció, káncs, warrás

a warró jólcsővel energiája alacsonyabb \rightarrow nagyobb populáció \rightarrow erősebben warró jólcsővel

$$E_{\text{disp}} = - \frac{1}{r^6} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{3n^4} \frac{I_1 I_2}{I_1 + I_2}$$

α_1, α_2 - molekulák polarizálhatósága

n - közeg törésmutatója

I_1, I_2 - molekulák ionizációs energiája

Dem az ϵ , hanem a törésmutató szerepel

\rightarrow polarizálhatóság \rightarrow a térerősség változása hogyan reagál a molekulák elmozdulására.

gyorsan változó elmozdulás térre hogyan képes reagálni a molekulák.

→ ez a bresmutó - feynre vonatkozó anyag jellemző

A Jellemző E_{disp} Jellemző a szabadon mozgó dipólusok között. Jellemzőkhez

→ kvantumfizika jellemző, de mind a paraméter

dipólus momentum. $\underline{m} = \alpha \underline{E}$ (E - dehiszív térerősség)

α : a molekulák polarizálhatósága

miel a dipólusok e helyett n szerepel, e

$E_{int} \gg m_{int} \rightarrow E_{morgó dipólus} \ll E_{disp}$

→ E_{disp} - nem ki energia - meghatározó

Az összehajgásról csak csak akkor éne'nyer, ha
molekuláról nézzük a m_{int} -t ($r \gg l$)

$$E_{disp} = - \frac{1}{r^6} \left(\frac{\alpha_1 \alpha_2}{3n^4} \frac{l_1 l_2}{l_1 + l_2} \right)$$

Est a fizika általában nehéz meghatározni elméletileg
→ empirikus módszerrel határozható meg

Speciális est: hosszúság aláú 11 hidrogénben lévő
fehérjék, membránok lipidei

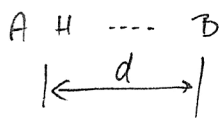
$E_{disp} \sim \frac{1}{r^5}$

Az elektrosztatikus kölcsönhatás potenciális energiájánál
kvantumfizika e és h energiája

Jellemző	kvantum fizika	dl. energia ($\frac{eV}{mol}$)
$r_{01} - w_1$	r^{-1}	200 - 300
$r_{01} - dl. dipólus$	r^{-2}	10 - 20
álló dipólus - álló dipólus	r^{-3}	1 - 2
dipólus - dipólus kölcs.	r^{-6}	0.3

Hidrogén hidas szerkezetek

Kvantummechanikailag még nem sikerült értelmezni teljesen



elektronegatív pillérbontás: O, N, F

A d túlnyomó a London kölcsönhatást túlsúlyozza és a van der Waals kölcsönhatást túlsúlyozza. Így az ϵ de $\epsilon \approx 0$ túlnyomó része kölcsönhatásban fordulhat elő. Ekkor független jülműködés kölcsönhatású H-hidak képződnek.

Ugyan olyan, amilyen nagy az energiaszint - London jelleg

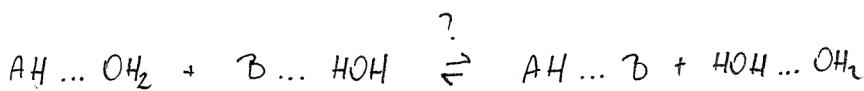
3-4 $\frac{kJ}{mol}$	\longrightarrow	80-100 $\frac{kJ}{mol}$
alifás szénhidrogének		enzimatiszus reakciók
		12-35 $\frac{kJ}{mol}$

biológiai makromolekulák

biológiai makromolekulák kémiai szerkezetének kialakulása

speciális szempontok:

- kölcsönhatás függ a körülményektől
- nem a ΔH , hanem ΔG vezérel
- (nemcsak kölcsönhatás energiája, hanem rendezettség)



- amidok és karbonil csoportok erős polárosok, de H-kötés csökkenti a polaritást \rightarrow H-kötés erősebb a fehérjék és lipid membránok felületén

- network-információ: H-atom donor atom kölcsönhatás

megvaltozok → no az elhanyagolhatos → jobb akceptor (10)
lesz → víz gáztól Jialszulone, H-kötésű láncolek
felületben

hidrofób hidroxilcsoportok

- biológiai macromolekulák belső szerkezetében igen jelentős
- Az oldatban egy felgombolyított polimer lánc
- csoportok része jobban szerkesztés belül lenni
 - ennek következtében a macromolekulák sűrűségeben vani fel
est a gombolyag formát
 - vízhez való csapódást elkerül a vízhez közeledés

A membrán szénhidrogén láncok is jobban szerkesztés
együtt felületi, mint a víz felület (hidrofób)

biológiai - felületi szénhidrogén láncok
komplexitást kint és innen víz-oldatban

Az apoláros szénhidrogén láncok együtt felületi
a víz-molekulákkal való kölcsönhatásokat csökkentik
→ hidrofób effektus

A víz miért nem szeret levezetni a szénhidrogén láncokkal?

termodinamikai értelmezés

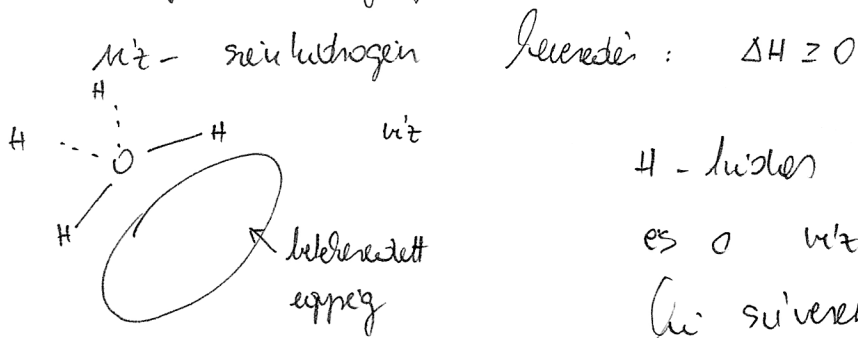
elv: szénhidrogén és víz kölcsönhatás energia-helyettesítést
széles

víz - víz
dipól - dipól kö.

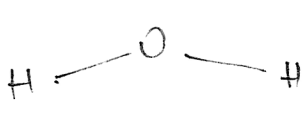
szénhidrogén - szénhidrogén
diszperziós kö.

↖ erős ↗

Mi helyzet a szupercsúbt?



H-atomok közelebb a szupercsúbt és a víz között nem alakulhat ki szilícium



az apódsz víz közelebb mint a szupercsúbt
 csúszlódás a víz molekulák és →
 szupercsúbt, a H-atom → az O felé oldal polarkon
 megváltozik → a többi H2O közelebb kerül
 → felépít egy rendező effektus

Kollektív hőmérséklet-hatás

T növekedés → diszperziós kölcsönhatás erősödik → megnövekedő
 rezgések → szupercsúbt egyenlő közelebb kölcsönhatás
 erősödik
 viszont a szupercsúbt víz molekulák orientáció jelenleg
 csökken → ennek a hatásnak az entropia növekedés
 → negatív entalpia (ΔH) függvényében a szupercsúbt
 $\Delta H < 0$

T csökken → a víz molekulák rendezett szerkezetet alakítanak
 ki egymással az apódsz molekulák felületénél
 → S csökken, de a szupercsúbt közelebb $\Delta H \approx 0$
 megengedett és az elválasztott állapot közelebb szupercsúbt
 megengedett állapotban a rendezésből eredő entropia változás
 kisebb

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S = \Delta G_{szupercsúbt} - \Delta G_{oldott} < 0$$

magas hőmérsékleten → entalpia (hőess hőmérsékleti energia) által
 vezérelt szegregáció
 alacsony hőmérsékleten → entropia (rendetlenség) által vezérelt
 szegregáció

Hydrotácitás erős

Hydrotácitástól eredő kúterek

Makromolekulákkal felületi békési kölcsönhatások víz-molekulákkal.

Molekula - molekula kölcsönhatásokhoz a kötött vízmolekulákat
 le kell választani.

A kötött víz-molekulák helyettesítése nagy energiát igényel - befektetést

pl. az
 rövid kúri kölcsönhatás → 0.1-szerese az elektrostatikus
 kölcsönhatásnak

Különböző jelentős: fehérjékben
 lipid membrán felületén

π-alkon - kation kölcsönhatások

Atomok színhidrogénhez képest

Atomok színhidrogénhez képest az atomok gyűrűi 6 db e⁻-t tartalmaz

→ ez az elektron felhő: c molekulák szétválasztásánál → megadható

az elektron/dipólus vonal → ez az azonos az

oldalsóan lévő pozitív töltésű részecskék

békés - kvadrupól (ket dipól)

békés - indukált dipól jelleg

$$\epsilon_{kk} \sim \frac{1}{r^3}$$

Vízben jóval kisebb, mint a Coulomb-keh. energiát

$$E_{\text{vít}} \rightarrow 0.5 E$$

$$E_{\text{cb}} \rightarrow 0.05 E_{\text{cl}}$$

Kovalens (atomi/kémiai) kötés - energetikai leírás (13)

Ki akarjuk számolni a nagy molekula energia állapotát egyensúlyi atomi távolságot + rezgésállapot

Harmonikus potenciállal közelítik a kötés egyensúlyi paramétereit
Kötésben

Harmonikus rezgés a kötés mentén: $E_{\text{kov}} = \frac{1}{2} \Phi (x - x_0)^2$

Φ : Kötésereőség x_0 : egyensúlyi kötéstávolság

A számításokhoz szükséges van a Φ kötés ereőség mértéke.

Ehhez használjuk a harmonikus rezgés leírását.

Tudjuk mérni az anyag által kibocsátott fény felvételét

IR spektroszkópiával: f

$f = \sqrt{\frac{\Phi}{m}}$ → Kötés ereőségét lehet számolni

Ez a kötés ereőség az egyensúlyi pont körüli
lineáris első elmozdulás függvény feltételezésével volt számolva
→ a molekula kötésereőségét megírod közelítésként
→ Hooke-tv. → innen volt az $E_{\text{kov}} = \frac{1}{2} \Phi (x - x_0)^2$ összefüggés

Használó harmonikus potenciálhoz lehet felírni az egyensúlyi
súlytól való eltérésekre is

A kovalens kötés távolságától való 10% -os eltérés
→ 10-szeres energiakülbséget okoz

pl. C-C kötés: $\Phi = 275 \cdot 10^3 \frac{\text{kJ}}{\text{mol} (\text{nm})^2}$

0,01 nm nyújtás → $E > 10 RT$

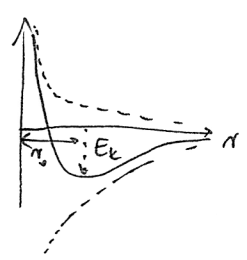
Eddig van kölcsönhatás

Közös tulajdonság: szterikus gát mellett

Ha csak van kölcsönhatás lenné, akkor 0 távolságra lenne az energiának minimuma

így kell lennie taszító kölcsönhatásnak is

A kerítés his távolságra lép elte



$$E_{pot} = \frac{B}{r^m} \quad \text{taszítás} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} m > n$$

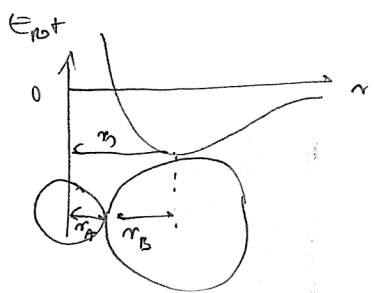
$$E_{pot} = \frac{A}{r^n} \quad \text{vonás}$$

r : kölcsönható részecskék távolsága

r_0 : egyensúlyi kötéstávolság

E_k : kötési energia

Atomi rádiusról értelmezés



A kötéstávolság ($r_0 = r_A + r_B$) és kötési energia E_k

a kölcsönhatási energia függvényét konkrét függvény-alapúval függ (a és b)

Kölcsönhatásokról más lesz az atomi rádiusról.

Gyengébb kölcsönhatás nagyobb atomi rádiusról jelent.

Szterikus gát a Pauli-elv alapján: dennard - Puer potenciál

Ha közel megy egymáshoz két atom, akkor az elektronjelölt

fordulni kezd

A Pauli-elv alapján egy elektron pályán maximum

$2e^-$ lehet maximumban - ebből adódik a kerítés

Ez egy rövid hatótávolságú kerítés

A van kölcsönhatást a diszperzív Van der Waals potenciál adja:

$$E_{L-7} = 4 E_0 \left(\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right)$$

↑
kötési energia

A makromolekulák szerkezete és komplex-képzése a környezeti molekulákkal való kölcsönhatás jelenlétében energia-minimum állapotot jelent

→ számítógépes elemzéssel megállapítható

Többi szerződés széttes szinten

A széttesen magasabb szerződés jön létre.

Egy egész széttes már nem lehet a kölcsönhatás energiáminimálisával leírni

Ha elég lenne a számítógépes kapacitás a számításhoz

→ valószínűleg az eredmény nem lenne jó

Ha nagy a n . az energiáminimimum számításával már nem tudjuk leírni

A biológiai folyamatokban az energiáminimimum-elvel statisztikus jelleggel érvényesülnek.

Kötéses folyamatban felmeradnak és újrapülnek, a jötekesorsszeget Iwaszavcsukaja alapján

"szubsztitutió dinamikája"

Az energiáminimimum elv alapján statisztikus jövelet lépnek

→ nem számoltunk arról, hogy elvadás van

→ energia állapotok többsége → nem minden jövelet lesz az energia minimum helyzetében

Boltzmann-elvadás

N független részecske - T_r termikus egyensúly

ϵ_i - rendszer egy mikrodállapotában egy részecske energiája

Mikrodállapot: az összes részecske konkrét energiáállapotát definiálja

Az N független molekulából álló n . kljés energiája

$$E = \sum n_i \epsilon_i \quad \sum n_i = N$$

A többségi számok egy konkrét sorozat { n_0, n_1, \dots } ?

jelent a \sum egy mikroállapotot

Egy konténer ϵ a mikroállapot - ha viszont nem
Jutunk ki meg az egys részecskéket az a mikroállapot
- akkor azt mondjuk meg, hogy mennyi részecskék van
az egys szinten

- n_i db részecskék van ϵ_i állapotban

$$p_i = \frac{e^{-\frac{\epsilon_i}{kT}}}{Z}$$
 Amely valószínűsége, hogy adott ϵ_i energiájú
állapot a \sum -ben megalóssal

$$Z = \sum_{i=0}^{N_i} e^{-\frac{\epsilon_i}{kT}}$$
 állapotszám

$$n_i = \frac{N e^{-\frac{\epsilon_i}{kT}}}{Z}$$

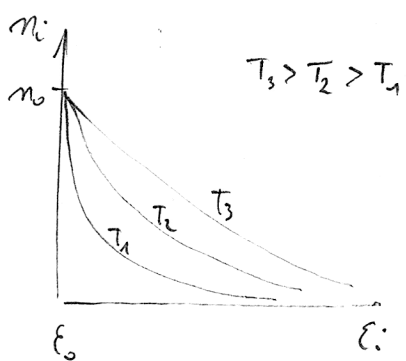
Két energiállapot relatív letöltöttsége

$$\frac{n_i}{n_0} = e^{-\frac{\epsilon_i - \epsilon_0}{kT}} = e^{-\frac{\Delta \epsilon}{kT}}$$
 (Boltzmann-élet)

-> Jut populáció arányát mondja meg

Akkor kT ide kT -t ha ϵ molekula energiája,
ha viszont egy molnyi mennyiség ϵ van ϵ_0 ,
 kT -t ϵ ide.

A lepleken hőmérséklet szerepel, azonban a jelenleg nem
hőmérséklet függő -> a formula pontos egyen súlyra
vonatkozik -> nem biztos hogy hőmérséklet utalódná
felismeretben ϵ mennyiség az az össze függés



Nagyobb hőmérsékleten a magasabb
energia szinten is több részecskék
van

Mit értünk a biológiai anyag "szerkezetén"?

Pl. macromolekuláris konformáció

Energia-minimum \rightarrow igen sokféle kölcsönhatás

alóru: foszfor-glicerát kinez

A konformáció sok "minodállapot" időbeli és térbeli exedője

\rightarrow hőmérséklet énértény

az alóru egy modell számítás eredménye van

\rightarrow két domaint tartalmaz, ami jól követhető, hol kezdődik egymástól

Molekuláris / macromolekuláris szerkezetet jellemző kölcsönhatások

$E_k \sim$ eldőlges kölcsés - ionos

- ionos

2-6 eV / kölcsés

- kémés

$E_k \sim$ midrodlagos kölcsés

H köd

0,1 - $n \times 0,1$

hidrofób kölcsönhatás

$\sim 0,1$

dipól - poláris

$\sim 0,1 - 0,2$

dipól - dipól

$\sim 0,02$

dipól - indukált dipól

$\sim 0,01$

rdölges dipól

$\sim 0,02$

(dispersziós) Van der Waals

Időnkint az összes dipolus kölcsést Van der Waals kölcséssel

leírják, azonban azonban csak a dispersziós kölcsést

leírják egy

Elektronvolt

$$1 \text{ eV} = 23 \frac{\text{kcal}}{\text{mole}} \sim 100 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

Szerkeleti rend termodinamikán $T = 310K$

Kérdés: Van-e olyan kötés a szerkeletben, ahol az energiaállapot a kötött állapothoz képest éppen a kötési energiával megegyező?

$$\frac{n}{n_{\text{kötött}}} = e^{-\frac{E_k}{kT}} \approx \frac{n}{N}$$

n : kötés energiával lévő kötés szám
 → Mennyi az a kötés?

$$kT \approx 0,024 \text{ eV}$$

$$T = 310K$$

$$k = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$$

$$RT \approx 2,6 \frac{kJ}{mol}$$

Boltzmann-állandó

Energiaiban két megfigyelhető jellemző a kölcsönhatások

$$kT = 0,024 \text{ eV} \leftrightarrow E_k$$

Elődleges kötés pl $E_k = 2,7 \text{ eV}$

$$E_k \gg kT \quad \frac{n}{N} \approx e^{-\frac{2,7 \text{ eV}}{0,024 \text{ eV}}} = e^{-100} \approx 0$$

→ Termikus okokból az elődleges kötés termodinamikán nem alakulhat fel

→ A szerkelet felépítő alapmolekulák szerkezete stabil

Másodlagos kötés

$$H \text{ hidrák} \quad \text{pl} \quad E_k = 0,1 \text{ eV} \quad \left(1-7 \frac{kcal}{mol}\right)$$

$$\frac{n}{N} \approx e^{-\frac{0,1 \text{ eV}}{0,024 \text{ eV}}} \approx e^{-3,7} = 2,46 \cdot 10^{-2} \approx 2,5\%$$

Hidrofób kölcsönhatások

Van der Waals kölcsönhatások

A másodlagos kötés jelentős számban felmereszkedik termodinamikán → szerkeleti dinamika

pl: DNS-ben 40 000 példányból 2,5% felmered

- ez jó mérőszám
- statisztikailag ennél helyes van felmerést látni de nem tudjuk megmondani, hogy hol
- dinamikus helyzetben → felmerés ↔ visszal
- ez a 0-as elmozgási terület

A szerkezet dinamika alapvetően pontos szerepet lép a lokális mekánikus funkcionális kölcsönhatásokban

A Boltzmann-eloszlás figyelembe vétele az energetikai megfontolásokban: az elektrostatikus potenciál leírása a Poisson-Boltzmann-egyenlettel

Nem olyan egyszerű a kép, mint amit az energia minimum elvől tanulunk - statikus lép

vi. Boltzmann-eloszlás

Ezen kívül pontöltést sem tekinthetünk fel

→ az elektrostatikus egyenlet öltés eloszlás

Töltésűség eloszlás elektrostatikus potenciált nézzük

→ ez lenne a pontosabb leírás

→ Poisson egyenlet: pontöltéses helyzet eloszlás

öltésűség-eloszlás megfelelő potenciál függvény: φ

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{\epsilon} \rho(\mathbf{r}) \quad (\text{Maxwell-egyenletből lép fel})$$

φ - potenciál eloszlás } mindegyik a három térkoordináta
 ρ - öltésűség eloszlás } függvénye (\mathbf{r})

∇ - gradiens operátor $(\frac{\partial}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y} \quad \frac{\partial}{\partial z})$ → mindegyik

koordináta szerint derült → eredménye vektor

→ meggyőző az eredménye skalár

Potentialen vezett munka a φ potenciálterben

$$\Delta E = qU = q(\varphi_2 - \varphi_1)$$

(20)

A töltéssűrűség eloszlás:

$$\rho(r) = q_e N_{Av} \sum_i z_i c_i(r)$$

q_e - elemi töltés

$c_i(r)$ - ion koncentráció $\frac{\text{mol}}{e}$ $c_i(\infty)$ - bulk konc., ahol $\varphi(\infty) = 0$

Boltzmann-eloszlás függvények vektora:

$$\frac{c_i(r)}{c_i(\infty)} = e^{-\frac{q_e z_i \varphi(r)}{kT}} \quad (E_k = qU = \rho \cdot \varphi)$$

Poisson-Boltzmann-egyenlet

$\varphi(r)$ elemi potenciál függvény, ami függvények vektora az ionok sűrűségétől levezetve

$$\nabla^2 \varphi(r) = -\frac{4\pi q_e N_A}{\epsilon} \sum_i z_i c_i(\infty) e^{-\frac{q_e z_i \varphi(r)}{kT}}$$

Bevezető fejelet az előző előadásról:

Molekuláris dinamika: egy modell-szimuláció eredménye volt látható
 ps-os időskálán → mozgás volt látható - egy adott hőmérsékleten
 csoport József felvételén, majd visszaálltak
 A szimuláció eredményeként látható volt, hogy voltak tartományok,
 amelyek merevebbek voltak, voltak, amelyek mozgékonyabbak
 Egy másik ábrázolás → két doménből álló fehérje (foszfolianát
 kináz) → ezzel a modell-szimulációval itt nem atomi szintű
 részletekkel ritka fel az energiát a modellben
 az időtartomány nagyobb léptékű időtartomány → ms
 A szimuláció eredménye egy József és egy kioldás
 → ez a mozgás József-átvitelt működik

Elektronmágneses sugárzás és biológiai rendszerek

Ionizáló és nem-ionizáló sugárzás

Sugárzások és biológiai rendszerek

Nem ionizáló sugárzások: látható fény

Ionizáló sugárzások - Röntgen-sugárzás és a γ -sugárzásról lesz szó

Az elektronmágneses sugárzások / hullámok

→ teljes felületi áttörésmennyiség felhőre λ

Az embernek ~~10^{24} Hz-es, vagy 10^{16} - 10^8 m hullám-~~
 hosszú áttörésmennyiség van a környezetben

A látható fény ekkor a áttörésmennyiség és egy szűk réteg

A hullámhossz vagy frekvencia megfelelő energiát

$1 \rightarrow 10^{26}$ eV ($1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$)

A látható fény: 1,55 - 3,1 eV vagy 400 - 700 nm

Az ennél nagyobb hullámhosszú, vagy alacsonyabb energiájú elektromágneses hullámokat röntgen hullámoknak nevezzük

A Röntgen-sugárzás (angolul X-ray):
10 - 300 eV vagy $10 \cdot 10^7$ pm (hullámhossz)

A γ -sugárzás még nagyobb energiájú, vagy ~~é~~ kisebb hullámhosszú

Elektromágneses hullámok

(Transzverzális hullámok - a terjedési irányra merőleges irányok)

Az ábrán polarizált hullám látható - vagyis az elektromos térerősség (E) vagy a mágneses térerősség (B) irányai a terjedési irányával együtt egyetlen síkban mozognak (más oldalon irányi jelzés)

E és B irányok egymásra merőlegesek - felváltva és párhuzamosan mozognak

Elektromágneses hullámok fontos tulajdonságai

T- periódusidő $f = \frac{1}{T}$ frekvencia λ : hullámhossz

$c = \frac{\lambda}{T} = f \lambda$ terjedési sebesség $c = \frac{E}{B}$

~~széles~~ ~~széles~~ $c \approx 3 \cdot 10^8 \frac{m}{s}$ vákuumban

Az elektromágneses hullámot hullámhosszra vagy frekvenciára szokás leírni.

Elektromágneses hullámok - hullós természet?

Az ember az egy vagy hullámként, vagy részecskéket tudja felismerni az anyagi dolgokat.

Az elektromágneses hullámok esetében mindkettő leírás szükséges lehet.

Az elektromágneses ~~hullám~~ hullámokat hullámfizikával, és úgy is, mint ha anyagi részecskének lennének, vagyis mint ha részecskékből állna.

Az alacsony energiájú és hosszú hullámhosszú elektromágneses hullámokat inkább a hullám leírásnál lehet jól megközelíteni. (Helyesebb a rádió hullámok)

A nagy energiájú elektromágneses sugárzást inkább a foton leírással, ~~mint~~ részecske természetű jellegűként.

A fény köztes helyen áll - bizonyos jellemzői hullámtermészetűek, mások inkább részecske természetűek utalnak.

Pl. interferencia a hullámtermészet bizonyítéka. Hullámok találkozásánál az eredő hullám a két hullám-függvények összegeként számítható \rightarrow ennek következtében megerősít a két hullám hol erősít, hol gyengül egymást utasítva a fény az energiáját nem egyszerűen tudja átadni, hanem adagokban. Az egyezményi fényenergia adag a fény hullámhosszától (hullámhosszától) függ. A nagyobb ~~energiájú~~ frekvenciájú nagyobb egyezményi energiát tartalmaz (h ν). Az alacsony természetűek mindig foton-alkon kölcsönhatásukat kell figyelni.

A fény hullám paraméterei

A látható fény: 400 - 700 nm

Rövidebb hullámhossz: UV fény \rightarrow három csoportra osztjuk annak alapján, hogy milyen a hatása a szervezetnek

UV-A: 315 - 400 nm

UV-B: 280 - 315 nm

UV-C: 200 - 280 nm

Az ennek ~~alacsony~~ rövidebb hullámhosszú fény már a Röntgen-sugárzáséhoz tartozik

A láthatóval nagyobb hull. hossz. infravörös IR

A fény hullám polarizációja

A kényszerített verő irányba meghatározott stabilitású nívó sziget mutat időben és/ vagy térben

a) síkban / lineárisan polarizált fény

A kényszerített verő irányba 2 hullám mentén állandó; átlós helyzet meg

b) cirkulárisan polarizált fény

A térirány verő végpontja a terjedési irányba jól spirálisan mozog

A fény kényszerített irányba menőleges síkba vetítve a kényszerítés (az elhanyagolható ϵ) is és a módosítás (B) is) egyenletes Jörmögést vezet.

Bláros fény \Rightarrow A kényszerített verő irányba meghatározott stabilitású nívó sziget mutat időben és/ vagy térben

A lineárisan polarizált fény két, jobbra, ill. balra cirkulárisan polarizált fény eredője

Ugyanolyan optikailag aktív anyagot (molekulák, szerkezetek)

\rightarrow elforgatás a lineárisan polarizált fény kényszerített verő irányát - polarizáció irányát eltérít

Ok: speciális asszimmetria - tükrös szimmetria hiánya

Az optikailag aktív anyagot (általában) olyan vegyületek, amelyek molekulái nem hozhatók fedésbe a tükörképükkel; úgy viselkednek egymáshoz (a tükörképük), mint a jobb kez a bal

kezhez \rightarrow az ilyen molekulák asszimmetrikusak - az ilyen molekulákból álló vegyületeket jól ismert vegyületekhez viszonyítva Amikor ilyen molekulákból álló anyagot vizsgálunk, a tükörképük szerint \rightarrow még a sztereologatás előtt nem voltak optikailag aktívak, a sztereologatás után, jól látható

más optikailag aktív leter - frakcióképzéssel azonos
megnyitni, de ellenes előjelű

Ha a lineárisan polarizált fényt két ortogonális polarizációs
fény összetételére bontjuk → optikailag aktív anyagban
az egyik irányban ortogonális polarizációs komponens
kezdési sebessége más lesz, mint a másiké
→ ez viszont összefüggésben áll a kiralitás meg, mint
egy kezdeti sebességgel mozgó fény, ami a kiralitás
irányában szimmetriát elbont

Az optikai forgás mértéke a molekula minőségére
jellemző és arányos a koncentrációval.

Elliptikus polarizált fény
Olyan optikailag aktív anyagból származik, amelyhez az egyik
és a másik irányban forgó ortogonális polarizációs kom-
ponensnek nemcsak a kezdeti sebessége, hanem az
amplitúdója is más lesz, vagyis nemcsak a fázisváltás
más (ami a sebességet határozza meg), hanem az
abszorpció is

→ az eredő nemcsak körbe fog, hanem a forgás során
a kiralitás irányában egy ellipszist is le, vagyis az
egyik irányban nagyobb lesz az amplitúdója, mint a
másikban.

→ az eredő fény elliptikusan polarizált

Az elliptikus mentékeket mérve anyag szerkezet
ad lehetőséget → méréseknél a körös formák esetén
pedig a körös jellemzésre is jól lehet a módszer
használni, mivel a sóban lévő vegyületek önmagukban
általában optikailag inaktívak a kiralitás DNS-szerű

Isődve az anyag optikai aktivitást nyújt.

Vagy információátvezéshez kelő a fénynek adott környezetből

Fény-foton koncepció

- anyaggal való kölcsönhatás megismerése

A fényből az anyag csak rögzített energiájú egyrészletet képes elnyelni \rightarrow fény anyagi természet \rightarrow foton - "fény részecske"

Az energia egyrész: $hf = h \frac{c}{\lambda}$

h : Planck-állandó $h = 6,6 \cdot 10^{-34}$ Js

f : fény frekvenciája c - terjedési sebesség λ - hullámhossz

A fényelnyelés mértéke függ a hullámhossztól \rightarrow fotonenergia

Az abszorpció spektrum ezzel van összefüggésben

\rightarrow megadja, hogy az anyag a különböző hullámhosszú fényt milyen mértékben képes elnyelni

Ahol a spektrumban hiányosságok vannak, annak a

hullámhosszúknak megfelelő energia szintet jelölő vonalak jelennek meg az anyag elektronjainak energiáinak szintjei között

Fény elnyelésekor a foton energiáját abszolút \rightarrow annak hatására

az anyagban lévő egyik elektron egyik energiánál

egy feljebb lévő szintre ugrik \leftrightarrow amennyiben ez a szintkülönbség pontosan akkora, mint a fotonban lévő energia-

mennyiség

Általában a legközelebbi energiánál lévő elektronok fogják meg a feljebb lévő szintre ugrani. \rightarrow ezért általában csak a legközelebbi energiánál történik az átmenet

A vér színétől eltekintve a hemoglobinnak abszorpció görbéje van. A hemoglobinnak fényre 4 abszorpció van

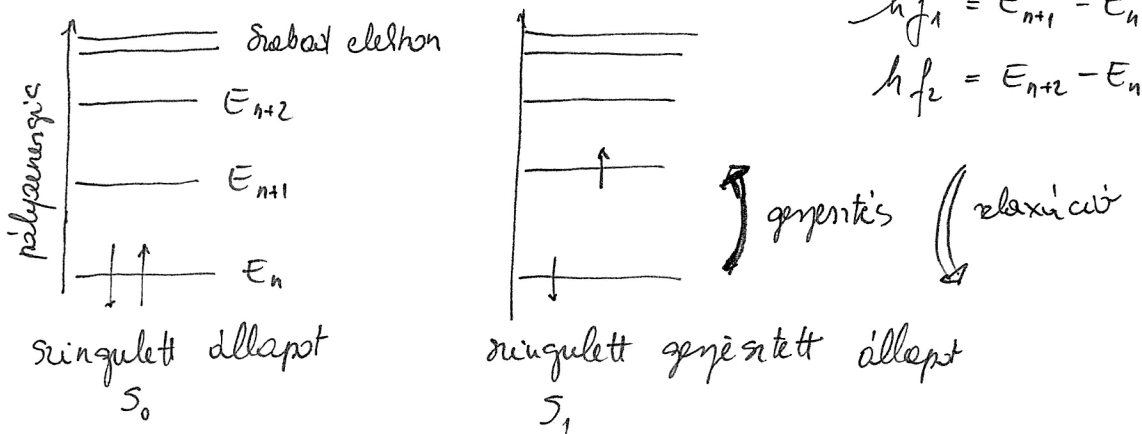
- mindegyiknél belül van egy csomópont \rightarrow az abszorpció görbéin ennek az elnyelést láthatjuk

→ ez enl e látható fény kibocsátásba
 A többi elektron pályára nem tud a látható fényből
 felvenni energiát → eme elektronok len

A szines oldat azért szines, mert bromos hullámműködés
 kibocsátást elnyel

A hemoglobin a zöldet nyeli el → ezért len piros a színe

Fénytelen elnyelés - emissió
 hosszult sémák, jelölések



Singulett állapot (sziget) : $\sum_i S_i = 0$

Gerjesztés az anyagot → az elektron felép egy magasabb
 energiaszintű állapotba - nem lehet, hogy a közvetlen
 felette lévő lép, hanem 1 állapot több mint is

Gerjesztés után, mikor abbamarad a fény bocsátás
 → az elektron visszatér az alábbi pályára

Ez a visszalépés köztudott S_1 lépésben → lépés
 egy lépéssel S_0 energiát szabad ki, de bocsátásban
 - ehhez nem fényt szabad S_1

Amikor egyetlen lépéssel ugrik vissza a legelső
 szabad szintre - ehhez bocsát ki látható fény
 (emissió) → ez a látható fény

Az energianívóknál szerepel S_1 nyitva az ott lévő elektronok
 spinjeinek az S_1 irányt jelölés.

Ha az egy spin irányt +1-ig, a másikat -1-ig
jelöljük → felírhatjuk az elektron pályáján lévő elektronok
spinjeinek az összeget $\sum s_i$

Ha ez zérus ($\sum s_i = 0$) singulett állapotot jelentünk
Singulett állapotokat jelentünk, ha az alsó szinten
kevesebb elektron van, és minden szinten két elektronos
spinű elektron található - S_0

Singulett gerjesztett állapotot jelentünk, ha ~~csak~~ van
pályán, ahol csak egy elektron van, de a pályán
összege a spinet meg is zérust jelent - S_1

Optikai elektron-átmenetek

fény ↔ elektron abszorpció és emissió

Egy példa - Cu-atom

→ Ez egy s-d elektronos át.

A legkisebb elektronpályán lévő átmeneti energiái a
látható fény tartományba esnek (~2-3 eV)

Ezért látható nagyobb az energia különbség

→ Röntgen-tartomány (~8 keV) (-1000-szer nagyobb)

Az alsóbb energiaszinten lévő elektronok felett már
elektronos üres → töltés → nagyobb energia kell
az elektronokhoz

Fénykibocsátás - emissió

Mérés: optikai spektroszkópia

- Elnyelési: abszorpció spektrum
- Kibocsátási: emissió spektrum

A spektrum görbe az elnyelés v. kibocsátás valószínűsége
saxerpe

Az x-tengelyen mindig energia szerepel (pl. részecske energia
vagy fény energia)

$A =$ x-tengelyen lévő energia lehet foton értéke a hullámhosszról
 Jövevény: $hf = hc \frac{1}{\lambda}$
 vagy részecske ütközéssel entiaj kinetikus energia:
 $\frac{1}{2} mv^2$

Mérs: optikai abszorpciós spektrum

Milyen fny - fotonok gerjesztik?

I : intenzitás = $\frac{\text{Energia}}{\text{felület} \cdot \text{idő}}$

I_0 : beesési intenzitás

Lambert-Beer-tör. $\rightarrow A \& D = \lg \frac{I_0}{I} = \epsilon(\lambda) \cdot c \cdot l$

c : kényszeri x mennyiség l : megtett fnyút hossza

A : Absorbancia D : optikai densitás

~~szó~~: A Jövevény áthaladása csökken az intenzitás

\rightarrow elvenett fotonok \rightarrow ez az energia mond v. mit az anyagból

\rightarrow Jönnyű lemejni

Ha tudjuk, hogy milyen anyag van ott, akkor az intenzitás növekedéséből következtetni lehet az anyag koncentrációjára...

De érdekesebb amikor a vizsgálata, hogy az adott anyag mit nyel el \rightarrow a spektrum alakja működési jellemző...

$\epsilon(\lambda)$ Molekuláris extinkció - kvantumkémiai értelmezés
 "Atmeneti dipólus-momentum"

Egy elektron átmenet valószínűségét a hiindulási és a vezető elektron közötti pályák kvantummechanikai határozzák meg (hullám-függ)

Kezdeti állapot

Molekulakvantumszámokban nem lehet aránytalan az eltérés

→ ez szabályozza, hogy melyik a kis valószínűségi átmenet ^(u)

Mennyit változhat a kvantumszámok?

$$\Delta n = \text{bármennyi}$$

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta m = 0 \text{ vagy } \pm 1$$

$S_0 \rightarrow S_2$ átmenet valószínűsége nagyobb
mint az $S_0 \rightarrow S_1$ átmeneté

→ erősebb jellemzős a spherumban

Gerjesztési vagy emissziós átmenetben az elektron spin állapota
nem változhat

Megengedett és tiltott átmenetek — nagy vagy kis valószínűségi
átmenetek

Ha az atom nemzár, ritka, de mégis előfordulhat — és
valószínűséggel a tiltott átmenet is — igen nagy intenzitással
toll bombázni, hogy egyszer-egyszer sikerüljön

Molekula - Jólionhatásban a környezettel

"szűz" spektrumok

Az elektron-pályák energiáit a molekulák drezet vibrációs
állapotai kis mértékben perturbálják

A drezet állapotok bonyolultak → egy energiaszint felbomlik
szélesre a különböző kvantumszámúakra — ezek továbbra is drezetek,
de szűzre vannak

A vibrációs minél mind az abszorpció, mind az emissziós
átmenetek fotonenergiaiban új lehetőségeket jelentenek.

Egyes fotonenergia helyett fotonenergia sorozata jelenik meg a
spektrumokban

A molekulák vibrációs $\propto T$ hőmérséklettel függnek

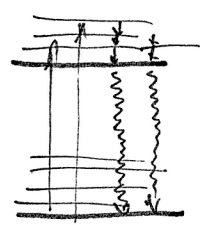
→ deklarárt jelenik meg az eredeti minőséget Jönnyekben.

Molekula - Jólionhatásban a környezettel
emisszió csak a legelső gerjesztett állapotból

Mivel az elektron-pályák energiáit a molekulák
drezet vibrációs állapotai kis mértékben perturbálják

vegyis az eredeti energiamió helyén egy szubon
sok nagyobb Jöveli mint jövel meg

Közke-szelety: fluoreszcival minis átmenet az alapállapotba
a szu felőbb energiatlakapothól
A szu felőbb állapotoktól az elektron elsőb lemegy
a szu legelőbb állapotba → vibrációs relaxáció
→ energiavesztás hő formájában → az S_1 állapotig
A fluoreszcia csak az S_1 (legelőbb) állapotból történik
Absorpció utánat lehetséges a szu felőbb energiatlakapotha is

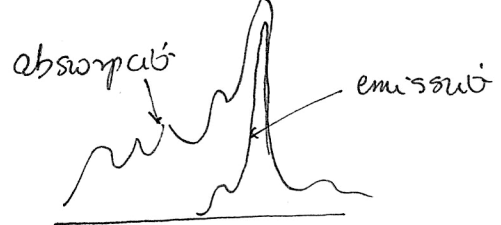


Ennek az lesz a következménye, hogy
az emissió kisebb energiaszint jövel meg
ly következmény, mint az absorpció
vegyis az emissió a gerjesztésnél
kisebbség jövel meg jövel meg

→ Stokes-féle eltolódás

A miért absorpció és emissió
sokk energidő elter egymástól

Az emissió spektrum mindig kisebb, mint az absorpció



A polarizáció (hullám-teljesítmény) szerepe a fény-absorpcióban,
fény emissióban

A molekulák gerjesztéskor elérhető állapot változás

→ töltéseltolódás

Dipólus változás jellemző: "átmeneti momentum"

- függ a molekula szerkezetétől, a szerkezethez orientált

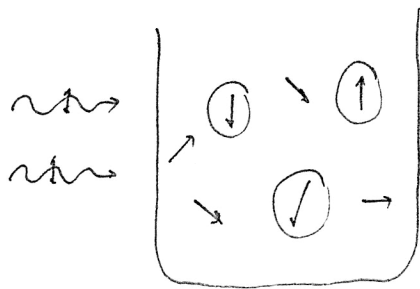
pl: triptofán: a molekula súlypont

Fotószerelés: példos fény elektronos terjedésig változások az
elektronok gerjeszti, ahol a feltett dipólus-momentum és a

károsítják a vektor irányba (követik) megfigyelik.

Emisszióban is dipolus jelleg érvényesül

polarizált gerjesztés → illó molekula → polarizált emisszió



← Fokuszáltság: a vertikálisan polarizált fény csak a megfelelően orientált körmel jelölt fluoroforok abszorbeálják

H₂ a molekula a gerjesztett állapot ideje alatt elfordul → az emisszió polarizációja csökken

He melyik az emisszió polarizációját (p)

→ a kótygászó körmpert (pl. plazma membrán) fluiditását jellemezhetjük (azt, hogy mennyire fordul el a molekulák a gerjesztett állapot ideje alatt)

A fény biológiai hatásai

receptorok:

Mi nyel el? Milyen mélyre jut?

Milyen reakciókat ér a fény?

Fényvel juttatott reakciók, krópusz beavatkozások

ismert hatások: - pszichó hatások szemre, bőrre (szemekre?)

- D- vitamin szintézis (UV-A)

- anyagcsere, hormonoz., immunoz. stimuláció (V15)

- téli depresszió & melatonin hormon lüktetése

... Sok az ismeretlen tényező!

Mit ér közvetlenül a fény?

Ismerő hatások: szemre, bőrre ~~(szemekre?)~~

Milyen molekulák nyel el?

hemoglobin, myoglobin, p-karotin, melatonin, DNS purin és pirimidin bázisai, kékfehér aromás aminosavai

+ Exogén kromoforok - amit Jivülöl usxi nr le
e'el fcs t'ekel / q'p'gy oxerel / Joz me' h'ikumok

A szun: az UV b'atomány már a felületen elnyel'edik
az IR b'atományt a víz nyeli el
A vér a látható fény b'atományában nyel el pt (hemoglobint)
→ ha vért akarunk Jozagol'olni, ezt a b'atományt Jell
használni

Bőr - a külső hő hőmérsékletig hullámhosszáig hullámokhoz más és
más a behatolás mélyéig - a vízhez van egy
határérték, ami víznyel'és mélyre hatol - de ez is
csak a bőr kéig al'ig ér le

Fény - keltő mechanizmusok és fényforrások

1, Hőmérsékleti sugárzás fényforrás spektrum
pl. Nap - emissziós spektrumának maximuma a látható
fény b'atományába esik

hőmérsékleti sugárzás oka: anyagok belső szerkezetének termikusán
gerjesztett részei → hőmérsékletől függ a spektruma

Nap: 6000 K

háztartás fényforrások (halogén gáz lámpa a szál párolgása ellen)
→ 3000 K ultra

A Nap spektruma kitelmas a látható fényen Jivülöl
b'atományból is - UV + rövidbb hull. hosszú (IR)
→ ezek nagy részét az ózon cs'ekenti

2.1 Spontán fényemisszió; lumineszcencia
Fény + Jelt' másid J'ndel - gerjesztett állapotból emisszió

Természetben ritka

Emisszió- előfeltétele: gerjesztett állapot

Alacsony hőmérsékletű testek fénykibocsátása

A lumineszcenciát meg kell különböztetni a hőmérséklet orok fénykibocsátástól, amikor a magas hőmérséklet orok fényjelenségét.

A* elhanyagolható módon gerjesztett állapotba kerül, és a gerjesztett elhanyagolhatóan nagy leperkedéssel vissza egy alacsony energiájú állapotba, hogy jórészt fényt bocsátson ki

A lumineszcencia ritka jelenség a természetben
→ egy-két anyag van csak, ami ezt képes

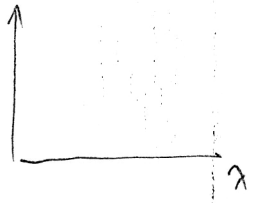
pl. triptofán, NADH → az egyetlen részben jórészt az NADH

- ha ilyen anyaggal festéket készítenek → ezt használják a színtest - általában tudják megfesteni a színtest adott részét

→ emissziós mikroszkóp - a színtest nélkül nincs ilyen tulajdonság → általában lehet vizsgálni a megfestett részit - mert minden jórészt...

Fótolumineszcencia: fény kibocsátása britek és gerjesztés

Emissziós spektrum



A fény absorpciója és az elbocsátása jórészt rövid időtávra történik (10 ns nagyságrendű), de speciálisan jórészt ez az idő akár óráig is eltarthat

Floreszcencia: az elnyelt elektromágneses sugárzástól elkészült hullámhosszú fényt bocsát ki
→ a legtöbb esetben hosszabb hullámhosszú - kisebb energia (nagyobb hull. hosszú, azaz nagyobb energiájú nagy lehet, hogy az elhanyagolhatóan nagy abszorbeál...)

Foszforeszcencia: semben a fluoreszcenciánál - az anyag nem

nem atommal sugározta ki a legrövidebb energiát
 → oka a kvantummechanikától ismert tiltott energiad állapot
 átmenet → bizonyos amplitúdóval ez igen lassan megy
 végbe (az eredeti gerjesztéshez képest óránként kétszáz
 alacsonyabb intenzitással)

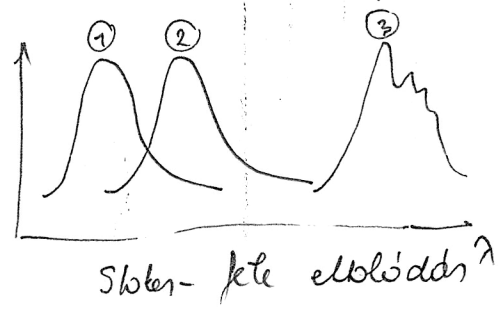
Kvantum hatásfok: (pl. lumineszcenciánál)

$$\phi = \frac{\text{emittált fotonok száma}}{\text{abszorbeált fotonok száma}} \leq 1 \quad \phi = \frac{k_f}{k_f + \underbrace{k_{isc} + k_{isc}}_{\text{nem sugározás átmenetel elemi állandói}} + k_q}$$

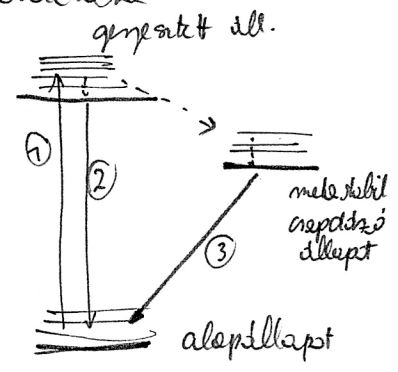
előzőt folytatva:

Förprészenca: spontán foton emisszió metastabil állapottól
 - csapdába esni az elektron → olyan állapotba kerül,
 ahonnan néhány száz másodpercnyi egy alacsonyabb
 energiájú állapotba → meg kell várni, amíg valamely
 hatás visszabrideli a spin állapotot (v. spin állapota
 miatt nem tud lejjebb lépni)
 → lassan lecsúszó jelenség
 Az emittált foton energiája kisebb, mint a fluoreszcenciáé
 Emissziós intenzitása igen kicsi → rossz állományok

Fluoreszcencia és förprészenca spektrumok összehasonlítása



- ① abszorpció
- ② fluoreszcencia
- ③ förprészenca



lumineszcencia alapuló fényképezés
 Alapja: gázküveték növekedéséből elhordolomineszcencia
 Zárt üveges üveg- vagy kerámia lejt végköl lejt elérhető
 helyszínről el. A csövek gázt töltik, azt kis nyomásra (10-1000 Pa)

leszűjnek és az elhódokra 100-1000 V egyenfeszültséget kapcsolunk. Ekkor a cső hossza mentén sajátos fényjelenséget észlelünk.

→ a katód irányából az anód felé nagy sebességgel mozgó elektronok a gázrészecskéket ütik meg ...

Az üvegcső elnyeli az UV fényt, a karc nem

Na-lámpák sárga fénye → germicid lámpa - alacsony nyománi higonygázos csőben emissziós spektruma 254 nm-es elnyelődik a hatékonyan genetikai állományában → sterilizáló hatás

Törlámpák:

Nagy nyománi Hg, Xe vagy Na-lámpák, rövidelt plazma indukció - folytonos spektrum jellegű csővel

Fénycsővel:

Az üvegcső felére vékony réteg levestet rendelkezik. A gázlevegő elhódumineszcenciája (Hg esetén UV fény) gerjeszti a fel levestéssel fluoreszcenciát. Ez már látható fény, ami áthatol az üvegcsőben. A látható fény spektruma a levestől függ. → célja a Nap spektrumának közelítése

Lezser

Spontán emissziós fény: Az egyes elhódok mentek kiken és valóban rendezetlenül, véletlenszerűen történnek. Az egyes hullámhosszok szára egymástól független. A fény inkoherens.

Indukált emissziós fény: A fény csőben emisszióját az emittáló foton energiával azonos energiájú foton jelenléte indukálja.

A koherens fénysugár a kóherens állapotban lép ki, együtt Jöhensen

(A nagy intenzitású fényszugár nagy számú gerjesztett elektronnal van szétterjedve, tehát el kell érni, hogy egy adott anyagban belül felszökjön az elektronok száma
→ energia befektetés → lézernél pumpálásos rendszer)

N_1 : alapállapotú elektronszám
 N_2 : gerjesztett állapotú elektronszám

alapállapotban: $N_1 \gg N_2$

felpumpált állapotban: $N_2 > N_1$

→ ezt az állapotot nevezzük populációinverzióval

LASER: Light Amplification by the Stimulated Emission of Radiation

A lézer-fény speciális tulajdonságai

- monokromatikus: $\frac{\Delta f}{f} \sim 10^{-10}$ (← 10^{-6})
- koherens (azonos fázisban vannak) - nagy a koherencia hossz (10³ m ← 10⁻³ m)
- kis divergencia (nagycsúszó sugarú) → jól fókuszálható
- nagy intenzitás

Röntgen-sugárzás

A fénysugár energiájához képest jóval nagyobb energiájú sugárzás → nemcsak gerjeszti, hanem hi is szabadítja az elektront → ezáltal ionizál

	fény	Röntgen-sugárzás (Röntgen-cső)
plonenergia	1.5 - 3 eV	20 - 200 keV
primér hatás	e ⁻ gerjesztés	e ⁻ ionizáció
elnyelési valószínűség	direkt plonenergiaátvitel	energia átvitel főleg valók

A Röntgen-sugárzás keletkezése és biológiai hatásai

Az intenzitás gyengülés fő oka az elnyelés, mint a fényelnyelés, mint a Röntgen-sugárzás elnyelése, igen hasonló paraméterek.

$$I_0 \frac{J_0}{J} = I_0 \epsilon(\lambda) \cdot c \cdot l$$

ϵ : fényben lévő oldat vastagsága
fényelnyelés c moláris koncentrációjú oldatban

$\epsilon(\lambda)$: fotonenergia és a molekula elektronpályájának kölcsönhatására jellemző anyagi ráfordítás
→ moláris extinkció

$$I_0 \frac{J_0}{J} = I_0 e^{-\mu x} = I_0 e^{-\mu_m \cdot \rho \cdot x}$$

μ_m - fotonenergia és az anyag elektronpályájának kölcsönhatására jellemző anyagi ráfordítás: tömegabszorpciós együttható
Röntgen-sugárzás elnyelődése "sűrűség", x vastagságú anyagban

Röntgensugárzás alhelmaximái

Röntgen-diagnosztika alapjai

A diagnosztikai alhelmaximák a Röntgen-sugárzás rövid elnyelődésen alapulnak

Kétféle mechanizmus a fotonenergiaól függő sűrűségi

Az elnyelt foton kétféle módon ionizálhat

- fotoeffektus

Nagyobb energiájú elektromágneses sugárzás (fény vagy UV fény v. R-sugár) áthalad egy anyagon (leginkább fém) felületén lévő elektronok felületén. - Egy adott határfrekvencia alatt nincs elektronki-bocsátás.

Egy foton h ν energiával rendelkezik. Ez az energia elnyelődik. Akkor lesz elektron ki-bocsátás, ha ez az energia eléri az elektron külső energiájának nagyságát.

- Compton-effektus

Nagy energiájú elektromágneses sugárzás hatására elektron

lép I_i az anyagból. Az elnyelt foton energiájának egy része a fűtési munkára fordítódik a maradék energiából a fűtési elem hőmérsékletének emelkedésére lesz. DE: lehet, hogy nem mind fordítódik fűtési energiára, hanem marad egy része, ami foton formájában lép ki \rightarrow a fűtési foton még mindig nagy energiájú, de az anyag megváltozik \rightarrow ezért nevesít sűrűségi \leftarrow de: az impulzus megmarad

Anyagon áthaladó az intenzitás:

$$I = I_0 e^{-\mu x} = I_0 e^{-\mu_m \rho x} \quad x: \text{vastagság}$$

μ : abszorpciós együttható $\mu = \mu_m \rho$ ρ : sűrűség

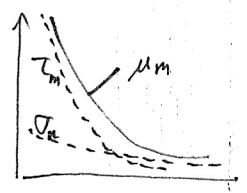
μ_m : tömeggyengítési együttható

$$\mu_m = \tau_m + \sigma_m$$

τ_m - a fotoeffektusból származik

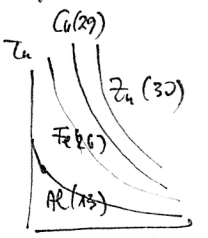
σ_m - a Compton-szórásból származik

τ_m - erősen függ Z -tól és a foton energiájától



$\sigma_m \rightarrow$ Compton-effektus valószínűsége kevéske függ a neutronától és a foton energiájától

$\tau_m \rightarrow$ ~~az anyag minőségétől is függ.~~ függ Z -tól



Röntgen-kép kontrasztja függ a

- sűrűség különbségektől
- neutron különbségektől

Az emberi test bizonyos részeit jobban látjuk, más részeit (pl. csontok) kevéske

γ -sugárzás

beta energia \sim MeV

Az elnyelés valószínűsége jóval kisebb, mint a Röntgen-sugárzásé \rightarrow gyakorlatilag zérus az emberi testben

felhasználható lehet beültetni az emberi szervezetbe

\rightarrow ha detektáljuk a γ -sugárzást, meg tudjuk állapítani, hogy mennyi jutott el a szervezetben a felhasználóhoz

Biofizikai termodinamika (Bio termodinamika)

Zsinyi Miklós

A termodinamika az ipari forradalom idején született → kérdés: milyen hatékonyan lehet a hővel munkát nyerni? (gőzgép)

→ Ma már nemcsak ez lehet gépezettel foglalkozni

Az energetikai kölcsönhatások során fellépő folyamatokat vizsgálja.

A termodinamika a fizikában a hőjelenségekkel foglalkozó ágból mára az energetikai kölcsönhatások folyamán fellépő egyensúlyok és folyamatok tudományává vált

Fő feladatai:

- változások és átmenetek mennyiségi és az egyensúlyi végállapot felirható tulajdonságainak értelmezése, valamint

- az egyensúlyt és a hozzá vezető folyamatot befolyásoló tényezők felderítése

¶. a termodinamika törvényei alapján az átmenetek megvalósíthatóságát vizsgáljuk

Változások és átmenetek mennyiségi meghatározása

A folyamatot és a folyamat vezető milyen módon lehet befolyásolni

A termodinamikában két dolog van

Fenomenológus és statisztikus termodinamika

Fenomenológus → a jelenségek leírásánál

Eredménye a három fő törvény → bizonyítani nem lehet őket, vagy levezetni más törvényekből - tapasztalaton, kísérleteken alapulnak

Statisztikus → molekuláris szinten értelmezi a folyamatokat

→ az okot keresi

Fő feladat: a kölcsönhatások felvételére utalások és
áttekintés - irányítás.

- mozgató erőink és
- befolyásoló tényezőink feldolgozása

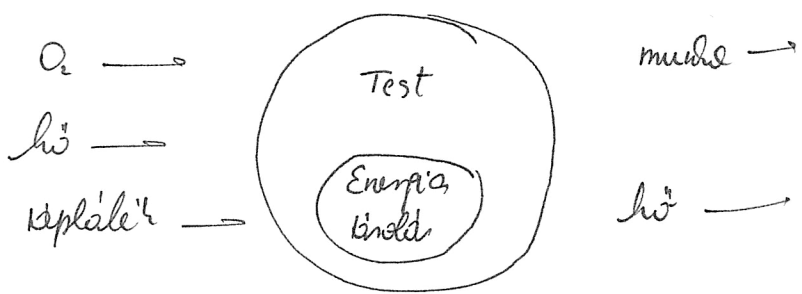
Törvényi áttekintés

biológiai, kémiai, gazdasági, pénzügyi és egyéb sz. -ok

Termodinamikai sz. → sz. és Jörnyket → Jöszök Jöszökhatás
→ de lehet köztük valamiféle szigetelés is

Ma már a hő olyan Jöszökhatás formája, mint a
lég → hőnek minősül kizárólag

Biológiai termodinamikai sz.



← Az energia mérleg legfontosabb komponensei

A testnek lemenő és jömenő anyag és energia szerepe van

Biológiai sz. -ben a hőnek kizárólag szerepe van

szűk hőmérsékleti sáv: 0-42°C → itt utasgólódnak majd

Termikus Jöszökhatások.

- A hőmérséklet fogalom a hideg-, ill. melegítéstől fejlődött ki.
- Felismerése nem volt egyszerű - a hőérzet és a hőmérséklet nem volt u.az → pl. 0°C-os f és 0°C-os fém hőérzete nem u.az
- Az első hőmérséklet mérő készüléket Galileo Galilei állította meg
- Jean Rey francia orvos megalkotta az első hőmérőt 1631-ben

- A mai hőmérséklet skálát Anders Celsius nevével köszönhetjük (1742). A víz fázispontját 0 foknál vette, az olvadáspontját pedig 100 foknál
- A 100 fős hőmérsékleti skálát Carl von Linné fordította meg rágy, ahogy napjainkban is használjuk
- Ez nem azonos a termodinamikai hőmérsékleti skálával
→ Kelvin: az abszolút zérus: -273.15°C -nál
$$T[\text{K}] = t[^{\circ}\text{C}] + 273.15$$

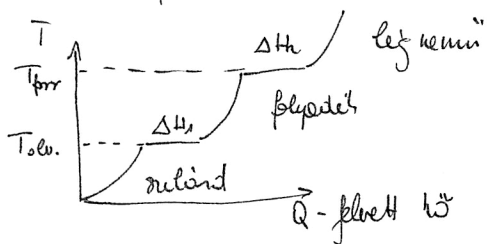
- Az USA-ban egy másik skálát használunk
$$T[^{\circ}\text{C}] = \frac{5}{9} (T[^{\circ}\text{F}] - 32)$$
 F: Fahrenheit

Ha egy testet hőt vesz ki -> hirtelen hővesztés történik

- van, amikor a hőmérséklet változik
- van, amikor hő leadására nincs hőmérséklet változás
→ látni lehet

pl: jeg olvasása: csak a szerkezet változik

→ fázisátmenet → az ehhez tartozó hő a látni lehet



Amikor a hőmérséklet változik:

$$\Delta Q = \int c \Delta T \quad c: \text{hőkapacitás}$$

Termodinamikai 1. és 2. típusú törvények leírásán alapul

- 1. törvény: sem energia sem anyag nem származik a hirtelen le.
- 2. törvény: anyagok károk, de energiadramák történik a felszínükön
- 3. törvény: anyag és energiadramák és is történik a hirtelen le.

Exen Qivül megkülönböztelti is néhány speciális esetet:

- izoterm $T = \text{állandó}$
- izobar $p = \text{állandó}$
- adiabatikus $dQ = 0$

A biológiai n_2 -s p része megpóldlso konstans
a hőmérséklet és/ vagy nyomás állandóságát...

Energia:

dehüt: helyzeti (mgh) / kinetikus ($\frac{1}{2}mv^2$) / belső

$$E = E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} + U$$

belső energia \rightarrow anyagot felépítő kémiai kötés
energiáiból áll

Az energiamegmaradás tétele

Leibniz - (1646 és 1689 között) megfigyelte, hogy sok mechanikai
esetben a mozgási energia (előeső) megmarad

Newton és Descartes megfigyelte az impulzusmegmaradás
tényét

Rumford 1798-ban megfigyelte, hogy az ágyúcsővé fűrészes hőkeltéssel
ad: a mechanikai munka hővé alakítható

Mayer felismerte, hogy a hő is, meg a mechanikai munka
is az energia egy formája

(Helyőnos volt \rightarrow a víz sűnéből ásvetkezlett az energia-
megmaradása)

Joule 1843-ban kísérletekkel meghatározta a hő mechanikai
egyenértékét (Joule sűsző volt)

Helmholtz 1847-ben megfigyelte az energia megmaradás
tételét (ő volt, aki ezt fizikusként bizonyította)

A termodinamika 1. fejele

$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W_{mech} + \Delta W_{chem} + \dots + \Delta W_i$$

Az energia megmaradás törvényeinek legáltalánosabb megfogalmazása
→ A sz. energiájának megváltozása additívan adódik az energiacserekből

Az elegánsabb felírás:

$$\Delta U = T\Delta S - p\Delta V + \sum_{i=1}^K \mu_i \Delta n_i + \dots$$

Bármelyik energiacsere felírható úgy, mint egy intenzív mennyiség szorzata egy extenzív mennyiség megváltozásával

Az intenzív mennyiség olyan fizikai mennyiség (pl: T, p), amelynek értéke a sz. mennyiségektől (amely az alkotórészek számával arányos) független. Ezzel szemben az extenzív mennyiség függ a sz. mennyiségektől, megváltozhat (pl: V -változás)

A hő: $T\Delta S$ T : intenzív mennyiség
 S (entropia): extenzív mennyiség

Entropia - az egyik legmértékesebb mennyiség
→ eredetileg a hő hirtelen szételvezése, de kiderült, hogy mindenféle kölcsönhatásban szerepel entropia

Entropia - anyagi sz.-el rendelkező, illetve termodinamikai valószínűség mértéke

Egy termodinamikai sz. akkor képes munkavégzésre ($\Delta W_{mech} < 0$), ha belső energiáját csökkenti ($\Delta U < 0$), vagy ha környezetéből hőt von el ($\Delta Q > 0$), vagy más formában energiát vesz fel ($\Delta W_i > 0$)

$$\Delta W_{mech} = \Delta U - \Delta Q - \sum_i \Delta W_i$$

Perpetuum mobile - olyan hipotetikus gép, amit, ha egy óra beindítunk, önként mozgásban marad, miközben nem von el energiát a környezetéből és a lehő energiája is állandó szinten marad

1) az elsőfajú öntermelő olyan gép, ami több munkát végez, mint amennyi energiát felvesz a környezetéből. Egy ilyen gép hatásfoka nagyobb, mint 100%. Az energia megmaradás törvénye (a termodinamika I. főtétele) alapján ilyen gépet nem lehet készíteni

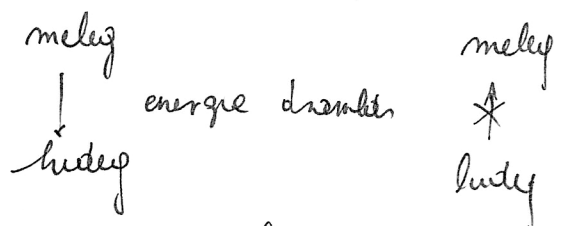
2) a másodfajú öntermelő gép olyan, ami a környezetéből felvett hőenergiát csak részben munkavégzésre tudja fordítani. Egy ilyen gép hatásfoka pontosan 100%. A termodinamika II. főtétele alapján ilyen gépet nem lehet készíteni.

A termodinamika II. főtétele

Elszigetelt rendszerben az öntént leforduló (kiegyenlíthető) folyamatok során az entropia növekszik

dehátlan olyan periodikusan működő gépet elképzelni, amely egyetlen hőforrásból hőt von el, és azt teljes egészében munkává alakítja

Másodfajú perpetuum mobile működése nem ellentétben az első főtételel, de megvalósítható a II. főtétele yardiján



Az entropia → a hőhatás lépésén lett levezetve → leszűkült lett kevesebb → minden hőhatásnál van

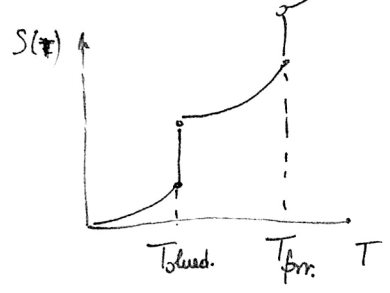
Folyamati során gyorran lemelő energia növekedésről
 azután azt is -ben az össz energia nem változik
 → pl. elpézelhető, hogy a meleg még melegebb lesz
 (az energia mérték miatt)

Az entropia lesz a még nem maradó mennyiség
 → ez lehetősége még a folyamati irányt

Tapasztalat: az idővel fejlődő folyamatban az entropia
 mindig növekszik → II. főtétele - az egyik legfontosabb
 természeti törvény

(fizikai fejlődés → hővel elmélet → Itt lesz, ha
 elérjük az entropia maximumát?)

Az entropia függése a hőmérséklettől



A változó hőmérsékletű szakaszon:

$$\Delta S = \int \frac{C_m}{T} dT$$

Az állandó hőmérsékletű szakaszon
 (fázisátalakulásoknál):

olvadás: $\Delta S = \frac{Q_{olv}}{T_{olv}} = \frac{\Delta H_{olv}}{T_{olv}}$

fűzés: $\Delta S = \frac{Q_{fűz}}{T_{fűz}} = \frac{\Delta H_{fűz}}{T_{fűz}}$

Az entropia, mint a molekuláris rendezetlenség mértéke

Olvadás kristály → szilárd

$\Delta H_m > 0 \quad T_{op} = \text{dll} \quad \Delta S_m(T_{op}) = \frac{\Delta H_m}{T_{op}} > 0$

Fűzés folyadék → gáz

$\Delta H_m > 0 \quad T_{fp} = \text{dll} \quad \Delta S_m(T_{fp}) = \frac{\Delta H_m}{T_{fp}} > 0$

Az állandó hőmérsékleten lejáratódó frizidatikus sörben az entropia a rendezetlenség növekedésével együtt nő. Dehát jól az entropia változik.

Az entropia növekedésével → rendezett állapottól hirtelen a rendezetlenség felé

S (entropia) szempontból van a molekuláris szintű rendezetlenség

Spontán folyamatok → a rendezetlenség spontán felé történik

A rendezettség feloldásához energia kerül szükséges hirtelen

Hűtés során → a folyamat és hirtelen a hőmérséklet nem változik, pedig hőleadás történik → nő a rendezettség

Entropia → termikus entropia (a hőmérséklet változik)
→ konfigurációs entropia (a hőmérséklet nem változik)

$$S = S_{term} + S_{konf}$$

Az energia abszolút értéket nem tudjuk → ez mindig egy relatív mennyiség

Az entropia viszont egy olyan mennyiség, aminél tudjuk az abszolút értéket

Gáz adiabatikus expanziója

Adiabatikus esetben a gáz a környezetétől termikusan elszigetelt → S = állandó → ΔS = 0



→ a rendezetlenség növekszik $dS_{konf} > 0$

Az össz entropia változás zérus →

$$dS = dS_{\text{konfig}} + dS_{\text{term}} = 0 \rightarrow dS_{\text{konfig}} = -dS_{\text{term}} \rightarrow dS_{\text{term}} < 0$$

$$dS_{\text{term}} = \frac{C}{T} dT < 0 \rightarrow dT < 0 \quad \text{A gáz lehül!}$$

Adiabaticus netlen az entropia változás: 0 - az össz entropia állandó

Hirtelen hűtőgázt gáz szobában is ez van
 a térfogat miatt a molekuláris rendezettség nő
 → a konfigurációs entropia nő
 → ezzel szemben kell lennie v. milyen entropia csökkenés
 közepesen → lehetséges → a gáz lehül → így marad
 az össz entropia állandó

A termodinamika III. fejelet

Tiszta kristályos anyagok entropiája nulla az abszolút zérus ponton:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(T) = 0 \quad S = k_B \ln W$$

Az entropia abszolút értéke zérus. → abszolút nulla felett a kristályos szerkezetek entropiája zérus

A III. fejelet Nernst-jelezi utón, Planck pedig az entropia statisztikus értelmezése alapján fogalmazta meg

Boltzmann: a termodinamikai valószínűség alapján tudjuk számolni az entropia abszolút értéket

$$S(T) = \int_0^T \frac{C_p}{T} dT + \Delta S_{\text{konfig}} \rightarrow S(T) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{standard entropia}}}{S^\circ(T^\circ)} + \int_{T^\circ}^T \frac{C_p}{T} dT + \Delta S_{\text{konfig}}$$

Mivel komplexebb szerkezetű egy molekula, annál nagyobb a standard entropiája.

Nernst. az abszolút hűtött kristályos anyagok entropiája nulla Kelvin hőmérsékleten zérus. Olyan abszolút hűtött kristályos

anyag, amelyre a Nernst megfigyelése érvényes lenne, a természetben nem fordul elő, ideális fázis, tehát nulla entropiájú anyag nem létezik.

Ujabb megfigyelésekben: az abszolút nulla hőmérséklet tevékenesen megközelíthető, de nem érhető el.

→ az abszolút nullához közeli hőmérsékleten az anyagok fázisra nagyon kicsi → igen kis hőmennyiség a hőmérséklet jelentős megváltozásához vezet → hűtés után: a lehűtendő test valamilyen fokú visszamelegedése elkerülhetetlen...

Standard entropia:

az $S(T) = \int \frac{C_p}{T} dT + \Delta S_{konfig}$ kifejezésben az integrál

meghatározást megnehezíti az, hogy az integrálást a gyakorlati felhasználat hőmérsékletétől ki kell elvágni

Ennek kiküszöbölésére vezették be a standard entropiát, amely megadja a fázisok standard állapotban, a $T = 298K$ hőmérsékletig tartó számított.

$$S(T) = S^\circ + \int_{T^\circ}^T \frac{C_p}{T} dT + \Delta S_{konfig}$$

Entropia növekedéssel járó folyamatok

Boltzmann-összefüggés: $S = k_B \ln W$ $k_B = \frac{R}{N_A}$

A W termodinamikai valószínűség megadja adott makroállapothoz tartozó mikroállapotok számát.


makroállapot: koncentráció

mikroállapot: molekulák eloszlása

a termodinamikai valószínűség értéke jóval nagyobb, mint 1

→ adott összetételű oldat → hőmennyiség módokon valószínűleg meg

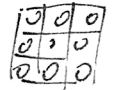
Az entropia növekedésének okai:


- részecske szám növekedése 
- hőmérséklet növekedése
- térfogat növekedése
- bomlani folyamat - disszociáció
- makromolekula gombolyodása
- olvadás, párolás
- elegyedés

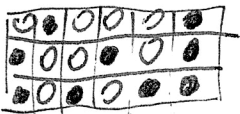
Az elegyedési entropia meghatározása

Tiszta alkotórészek - egyenként teljesen lekehegés

Elegyedés után - sok kölcsönhatás előlétes lekehegés

Elegyedés előtt A tiszta $W_A = 1$  $S_A = 0$

B tiszta $W_B = 1$  $S_B = 0$

Elegyedés után  $W_{AB} \gg 1$ $S_{AB} > 0$

$S = k_B \ln W$

kombinatorikus megfontolással: $W = \frac{(N_A + N_B)!}{N_A! N_B!}$

(Ugyanez az elv, mint a kombinációk lekehegés számra esetén - 30 elemet 5-öt lekehegés utáni állapotok száma)

A faktoriális konstans $(n! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot n)$ nem nagyon szerencsés közelítés: Stirling-formula: $n! \sim \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n$

$\Delta S_U = k_B \ln \frac{(N_A + N_B)!}{N_A! N_B!} \approx -k_B (X_A \ln X_A + X_B \ln X_B)$

ahol

$$X_A = \frac{N_A}{N_A + N_B} \quad ; \quad X_B = \frac{N_B}{N_A + N_B}$$

A moláris elegyének entropia : $N_A + N_B = N_{AV}$

$$\Delta_e S_m \approx -R (X_A \ln X_A + X_B \ln X_B)$$

A központi a molmolekuláris \approx -elkel foglalkozik

→ telepdományt döntő módon az entropia hatására meg

Az entropia növekedéséből lehet következtetni, hogy az adott folyamat milyen gyorsan megy végbe

Pf: cukor feloldása vagy lepirasztó (polymer molekula)

feloldása

cukor - kicsi molekulaméret, lepirasztó - polymer

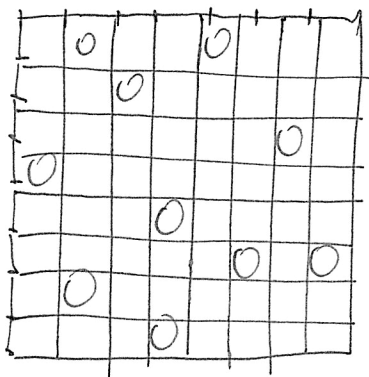
- nagy molekulaméret → atomok egymáshoz vannak

kapcsolódva

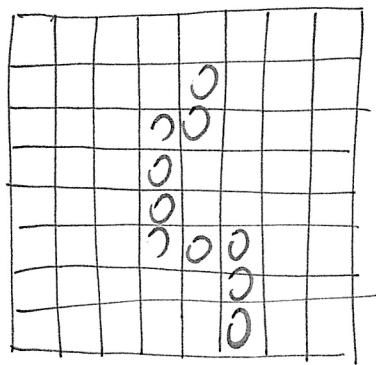
3x3-as rácsban helyeződik el 10 db elemet

cukor: az elemek oldalról lehetnek

polymer: az elemek szomszédosra is kell lenniük



$$W = 5,49 \cdot 10^{14}$$



$$W = 6144$$

Azért, hogy az elemek szomszédosra is kell lenniük, jelentősen lecsökkenti a lehetséges számot

→ Kiseb termodinamikai helybő

Az, hogy össze vannak kötve a kis molekulák, lehatárolja,

hogy hőmértékűppen vehetünk le a molekulákat.

→ a valószínűség függvényének a termodinamikai valószínűsége

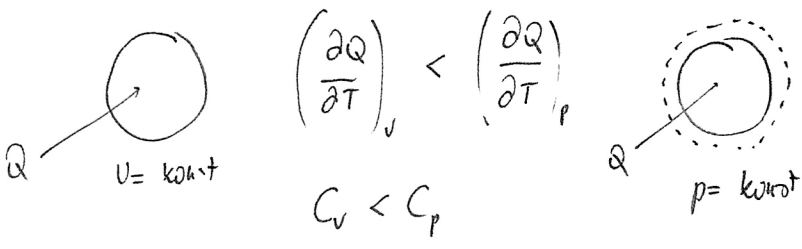
(Két polimer molekula összehasonlítása - ~~mind~~ kétféle részecskének)

Környezeti hatások

- izoterm $T = konst.$
- izobár $p = konst.$
- izochor $V = konst.$
- adiabatikus $S = konst.$

A belső energia egy része a környezet állapotát megváltoztatásához fordítható!

hasznosítható energia \neq belső energia



pl: izoterm vs. - a környezet a hőmérsékletet állandó szinten tartja - az energia hasznosítható része nem a teljes energia lesz, mert egy másik rész a hőmérséklet fenntartására fordítható

A hőtörvényekkel, amennyiben a hőt hűtjük, nem lesz egyforma a hőmérséklet változása

$p = konst \rightarrow$ hő egy része el megy a mechanikai munka felé (bővebben)

Hogyan mi az energia hasznosítható része az utolsó? \rightarrow mindkét esetben is megegyezik

izobár eset: H entalpia

hőközm ért: A szabadenergia

hőközm - rendszer ért: G szabadentalpia

$$G = H - TS$$

Enthalpia (H): hőtartalom = belső energia + térfogati munka ($p = konst$)

$$\Delta H = \Delta E + p \Delta V$$

~~biológiai rendszerben történő változások közel állandó nyomáson történnek, és a térfogati munka által~~

szabadenergia (G) (Gibbs-féle szabadenergia)

A két főkérdés egyenlete (P és T konst.)

Változik az a maximális energia, ami hasznos munkát tud végezni

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S \quad (\text{ahol } c \text{ az a } \Delta H \text{ és } \Delta S \text{ közötti}$$

Önként lejármadó folyamat: $\Delta G < 0$ exergonikus

szabadenergia feltelek: $\Delta G > 0$ endergonikus

Termodinamikai egyensúly: $\Delta G = 0$

Biológiai rendszerben történő

A termodinamika 1. főkérdése

$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W_{\text{meh}} + \Delta W_{\text{kem}}$$

ΔU : teljes energia megváltozása

ΔQ : metabolikus hővesztés

ΔW_{meh} : mechanikai munka \rightarrow lehet pozitív v. negatív

ΔW_{kem} : kémiai munka

Hővesztés: metabolikus - felvett táplálékkal -

\rightarrow az az anyagcserevel kapcsolatos

+ hővesztés \rightarrow hővesztés hővesztés által okozott hővesztés

Mechonikai munka. Húnt más, mint amit a

fizikában megszoktunk

pl: többi egy képlet egy helyben → fizikai értelemben nincs munkavégzés, biológiai értelemben megpi érteink munkavégzés → ez a felső munkavégzés → az az mind fizikai állapotúval van össze függésben

Bio-erítés - kémiai munka - pl: ATP molekulában tárolt energia

Az élő szervezetek vegylenő anyagcseréje folyamatos összeállítás: metabolizmus

- felépítő folyamat: anabolizmus

pl: aminosavak → fehérjék $\Delta G > 0$ (zobade. defektív) felépítjük az energiát szolgáltató molekulákkal

- lebontó folyamatok: katabolizmus

pl. glükóz → CO_2 H_2O $\Delta G < 0$

A környezetből felvett anyagok beépítésre az élő szervezetek anabolizmus - két fajtája van

- fotoszintézis:

Egyszerű szerves anyagokból komplexebb szerves vegyületek felépítésére teljes szervezetek → egyszerű anyagokból szintetizál

- kemotézis

→ komplexebb anyagokból szintetizál

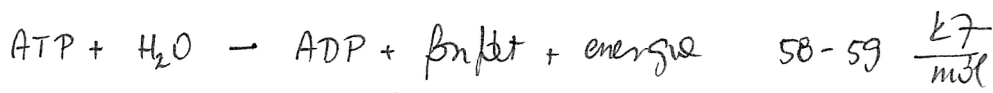
Az élő szervezetek kémiai reakciók során történő lipanyag lebontása: katabolizmus

poliszacharidok
lipidok, fehérjék
nukleinsavak



monoszacharidok
zrhisavak, nukleotidok
aminosavak





- A lebontás során energia termelődik

- a mozgás és a hő ebből lesz

Biológiai folyamatok mérése

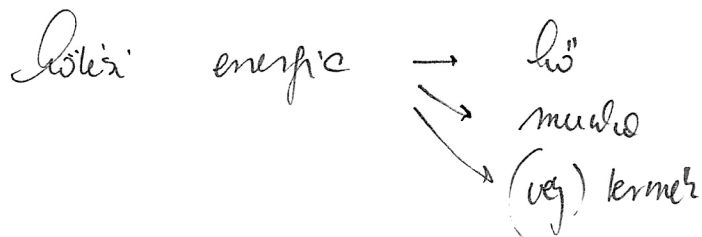
- direkt kalorimetria
- indirekt kalorimetria

Direkt Kalorimetria

$$\Delta Q = Q_{\text{metabolizmus}} + Q_{\text{vesztés}}$$

$$Q_{\text{vesztés}} = Q_{\text{szagrázó}} + Q_{\text{konvekció}} + Q_{\text{konduktív}} + Q_{\text{pszichés}} + Q_{\text{széles}}$$

54-60% 25% 7% 14%



A hővesztés legnagyobb része a hőszállítás

A konvekció és konduktív - a hővesztést jelenti

konduktív → az anyag érintkezéskor hővesztés
bőrtől

konvekció → az anyag in szomszédosban van - ezáltal
bőrtől meg a hővesztés

Például: az adóból adódik - a fűtéshez gasz
helyes állapotok szerint → ehhez energia kell
→ hővesztés

degen: a tüdőből a levegő levegő hővesztése
nem azonos a hővesztés hővesztésével

A direkt kalorimetria - nem nagyon elterjedt

→ ezért az anyagot → megmérjük a felhabaduló hő

Hess-tétel: az energia szempontból mindegy, hogy melyen úton megyünk az egyik állapotról a másikba. Ennek ellenére az anyag jelönmeiben mért energia-értéke és a megérés után mért energia mérés megparadoxon.

Indirekt Jelönmérés:

Nem az ember által termelt Q_{tot} termeljük közvetlenül, hanem mérjük az elhasznált O_2 -t és a kibocsátott CO_2 -t \rightarrow átváltjuk energiára (ez a legelképzhetőbb utasítási mód).

Az indirekt Jelönmérésrel mért energia nem egyezik azokkal, amik az elgyártott anyag mennyiségben lenne (amit a Jelönmérésben mérünk ki az anyagból).

A fotoszintézis energiája kisebb (kb. 60%-kal), mint a Jelönmérés energiája.

Az ember nyitott termodinamikai rendszer \rightarrow az alap energiapótlás (az időegység alatti energia utánpótlás) \rightarrow ez az, ami nyugalomban kell.

BMR - alap energia pótlás (Basal metabolic rate)

$$BMR = \left. \frac{dQ}{dt} \right|_{nyugalom}$$

Kleiber-törvény: $BMR \sim m_b^{\frac{3}{4}}$

\rightarrow a testtömeg $\frac{3}{4}$ -edik hatványával arányos

BMR fiziológiai köb, mint növény

BMR elektronok csökken

$$m_b = 70 \text{ kg} \quad 7029 \frac{\text{kJ}}{\text{nap}} \quad 293 \frac{\text{kJ}}{\text{óra}}$$

81 W férfi

60 W nő

Ez a nyugalmi állapotba vonatkozik

Energia igénye MR

alvás 83 W

sele 265 W

javított 400 W

Átlagos ember átlagos termikus jellemzői

hőhő: $3,47 \frac{kJ}{kg \cdot K}$

40 kg-os személy hőkapacitása: $243 \frac{kJ}{^\circ C}$

$$Q = c m_b \Delta T \rightarrow \frac{dQ}{dt} = c m_b \frac{dT}{dt} \rightarrow \frac{dT}{dt} = \frac{1}{c m_b} \frac{dQ}{dt} = \frac{1}{c m_b} BMR$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{BMR}{c m_b} \rightarrow \frac{dT}{dt} = 12 \frac{^\circ C}{óra} - \text{Ha nem lenne ventilláció és fizikai aktivitás}$$

Körülíró alapszám:

Hővesztés: sugárzás * 54-60%

levegő * 25% (konvekció, konduktív)

rezekció * 7%

legzés * 14%

Fizikai aktivitás értéke

$$\frac{dQ}{dt} = f BMR \rightarrow \frac{dT}{dt} = f \frac{BMR}{c m_b} \approx 12 \cdot f \frac{^\circ C}{óra}$$

fizikai aktivitásból függően: $1 < f < 20$

aktív	f
alvás	1
ideje	1.5
állás	1.7
gyaloglás	4.7

Hő sugárzás - J_i lehet nánádmá
lehet nyereség v. veszteség - akkor függően, hogy
melyen helyen vagyunk (hűvösebb v. melegebb, mint a test)

Wien- törvény : $R = \epsilon \sigma T^4$

ϵ : emisszió

$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$ Stefan-Boltzmann konstans

R : fluxussűrűség - egyenlő felületre jutó ~~hő~~ teljesítmény
v. egyenlő felületre egyenlő idő alatt
Játszódnak energiák ...

A_z ember általános felülete $A_s = 1,85 m^2$

A_z emberi bőr : $\epsilon \approx 1$

$-\frac{dQ}{dt} = R \cdot A_s = \epsilon \sigma T^4 A_s$

$\frac{dQ}{dt} = \left. \frac{dQ}{dt} \right|_{nyereseg} - \left. \frac{dQ}{dt} \right|_{veszteseg}$

Hőmérséklet Juttathatók adott hőmérséklet:

$R = \epsilon \sigma (T_1^4 - T_2^4)$ ($\epsilon_1 \approx \epsilon_2 \approx \epsilon$)

anyag	ϵ - emisszió
emberi bőr	0,95 - 0,99
le	0,99
brón	0,95
tegl	0,92

Konvekció hővezetés - direkt kontaktus esetén, amikor

az anyag áramlásban van

$-\frac{1}{A_s} \frac{dQ}{dt} = h_c (T_{bőr} - T_{levegő})$

h_c : egyenlő felületre vonatkozó konvekció hővezetési koefficiens

$h_c = 10,45 - v + 10 \sqrt{v}$ v : áramló levegő sebessége

legmöggs → a lvi levegővel érintkez → az dramlát
 levegő elvezetést is függ a hővezetési

Hővezetési lépéssel

Ki-és bevezetett keringet nyújtásban: 500 ml

Ki-és bevezetés fordulóján nyújtásban: 12-14 / perc

$$I_{\text{levegő}} = \frac{dV}{dt} \approx 0,1 \frac{l}{s} \quad \rightarrow \quad - \frac{dQ}{dt} = \rho c_p (T_{ki} - T_{be}) \frac{dV}{dt}$$

Hővezetési problémánál - az adás

Víz párolgáshője $\Delta h_{\text{párolgás}} = 2,25 \frac{kJ}{g}$

$$I_{\text{levegő}} = \frac{dV}{dt} \approx 0,1 \frac{l}{s} \quad \rightarrow \quad - \frac{dQ}{dt} = \Delta h_{\text{párolgás}} (\rho_{\text{levegő}}^{ki} - \rho_{\text{levegő}}^{be}) \frac{dV}{dt}$$

Konduktív Jövedel's

Nem a határfelületen lévő energia áram → belső szerkezetben
 lévő energiadram

$q_Q = -k \nabla T$ - hőmérséklet gradienssel arányos
 a hődrám (∇ : gradiens)

→ a hő az alacsonyabb hőmérsékletű hely felé áramlik

Fourier-Kirchoff-egyenlet: hőáraml. differenciálegyenlet

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T \quad \alpha = \frac{k}{\rho c_p}$$

Téshőmérséklet adataiban

metabolizmus ↔ hővesztés

Metabolizmus folyamatosan hőt termel → ezt le kell adni,

hogy a szervezet ne hevüljön túl → Jutó hőmérséklet

alacsonyabb mel. Jell kemlet → Jutóulap problémá

$T_{\text{ki}} = 20^\circ C$ ♥ fibrilláció

$T_{\text{sz}} = 30^\circ C$ hőm. szab. felbont

$T_{\text{sz}} = 33^\circ C$ hűtésre

$T_{\text{sz}} = 41^\circ C$ hp-i ritm. Jávossá

$T_{\text{sz}} = 42^\circ C$ fehérje denaturálód

$T_{\text{sz}} <$ hőmérséklet